

МОЖЕГОРОВ Алексей Анатольевич

**МАГНИТНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ
В ОРТОРОМБИЧЕСКИХ ДИЭЛЕКТРИКАХ
С СИЛЬНЫМ ЭЛЕКТРОН–РЕШЁТОЧНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

01.04.07. – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2008

Работа выполнена на кафедре компьютерной физики и в отделе оптоэлектроники и полупроводниковой техники НИИ Физики и прикладной математики ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

Научный руководитель — доктор физико-математических наук,
профессор Никифоров Анатолий Елеферьевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Куркин Михаил Иванович,

доктор физико-математических наук,
профессор Москвин Александр Сергеевич

Ведущая организация — ГОУ ВПО «Казанский государственный университет им. В.И. Ульянова–Ленина», г. Казань

Защита состоится 27 июня 2008 г. в «____» часов на заседании диссертационного совета Д 212.286.01 по защите докторских и кандидатских диссертаций при ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького» (620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина 51, комн. 248).

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ГОУ ВПО «Уральский государственный университет им. А.М. Горького».

Автореферат разослан «____» мая 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук



Н.В. Кудреватых

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Изучение кристаллов с сильными электронными корреляциями является важнейшим направлением современной физики твёрдого тела. В таких соединениях проявляется сильная взаимосвязь различных степеней свободы: решёточных, орбитальных и спиновых.¹ Для теоретического определения, например, магнитной структуры диэлектрического соединения необходимо учесть влияние на неё двух взаимозависимых факторов: решётки и орбитального движения электронов. Поэтому адекватное описание того или иного кристалла требует построения согласованной модели данного соединения, учитывающей сильную связь и взаимное влияние различных степеней свободы в нём.

Особенный интерес среди систем с сильными электронными корреляциями вызывают кристаллы, содержащие ионы с орбитальным вырождением. Изучение всей совокупности свойств таких систем получило название «орбитальной физики».²

Одними из наиболее ярких представителей сильно коррелированных соединений с орбитальным вырождением, находящихся под пристальным вниманием исследователей, являются перовскитные оксиды на основе $3d$ -металлов ($RTiO_3$, RVO_3 , $RMnO_3$, $RFeO_3$, $RCoO_3$ и др., где $R = La, Ce, Pr, \dots, Y$). Несмотря на продолжительное и усиленное изучение этих веществ, их полная физическая картина до сих пор остаётся не ясной.³ Более того, их последовательное изучение открывает всё новые и новые нерешённые проблемы. Наличие в одном и том же классе соединений таких явлений, как орбитальное вырождение, зарядовое и орбитальное упорядочение, переход металл–диэлектрик, ферромагнетизм и антиферромагнетизм и др. в настоящий момент не находит объяснения в рамках единого подхода. Поэтому построение адекватной модели упомянутого класса соединений является актуальным.

Данная диссертационная работа посвящена моделированию микроскопических свойств сильно коррелированных квазикубических перовскитов с $3d$ -ионами с учётом взаимосвязи решёточных, орбитальных и спиновых степеней свободы в них.

¹ См., например, Изюмов Ю.А., Курмаев Э.З. // УФН, т. 178, № 1, стр. 25–60 (2008).

² Keimer B., Olés A.M. // New J. Phys., v. 6, no. 1, p. E05 (2004).

³ См. обзоры: Imada M., Fujimori A., Tokura Y. // Rev. Mod. Phys., v. 70, № 4, p. 1039–1263 (1998);
ссылку 1.

Цель работы состоит в определении влияния решётки на орбитальное состояние, магнитную структуру и спектры спиновых возбуждений орторомбических диэлектриков с $3d$ -ионами в орбитально вырожденном состоянии. Для достижения этой цели решались следующие **задачи**:

- проведение симметричного анализа формирования кристаллической структуры орторомбической ($Pnma$) фазы;
- построение вибронного гамильтониана с неэмпирическими параметрами;
- расчёт низкоэнергетических электронных спектров ионов M^{3+} с орбитальным вырождением в соединениях RMO_3 (R = редкоземельный ион или Y , M = $3d$ -ион) в рамках приближения сильного электрон–решёточного взаимодействия;
- построение эффективного спин–гамильтониана (ЭФГ), и определение его параметров в рамках теории сверхобмена;
- определение равновесных магнитных структур орторомбических соединений RMO_3 ;
- расчёт энергетических спектров спиновых волн (СВ) и полевых спектров магнитного резонанса (МР) в рассматриваемых соединениях.

Научная новизна работы заключается в следующем.

- Проведён симметричный анализ кристаллической структуры орторомбической фазы квазикубических перовскитов и определены возможные механизмы формирования этой фазы в тех соединениях, которые содержат $3d$ -ионы с двукратным или трёхкратным орбитальным вырождением электронного состояния.
- Впервые с помощью вибронного гамильтониана, содержащего квадратичные члены, исследованы соединения $LaMnO_3$, $LaTiO_3$, $YTiO_3$, $LaVO_3$ и YVO_3 .
- Теоретически определены параметры сверхобменных взаимодействий ионов Ti^{3+} и V^{3+} в соединениях $LaTiO_3$, $YTiO_3$, $LaVO_3$ и YVO_3 .
- Теоретически получены магнитные структуры $LaVO_3$ и YVO_3 . Предложено модельное объяснение различных типов магнитных структур $LaTiO_3$ и $YTiO_3$.
- Впервые рассчитаны спектры спиновых (СВ) волн $LaVO_3$ и YVO_3 .
- Предсказаны полевые спектры антиферромагнитного резонанса (АФМР) в соединениях $LaTiO_3$, $YTiO_3$, $LaVO_3$ и YVO_3 . Показано, что, в отличие от спектров спиновых волн, спектры АФМР могут служить индикатором ор-

битального состояния ионов Ti^{3+} и V^{3+} в кристаллах $RTiO_3$ и RVO_3 соответственно.

Научная и практическая ценность работы состоит в следующем:

- установлены все ян-теллеровски–активные (ЯТ–активные) каналы структурного фазового перехода из кубической фазы перовскитов в орторомбическую;
- предложен метод определения орбитальной структуры соединений RMO_3 с использованием магнитного резонанса;
- развита методика численного расчёта изотропных и анизотропных сверхобменных взаимодействий между ионами в трёхкратно орбитально вырожденных состояниях;
- описанные в работе методы могут быть использованы для изучения других систем с орбитальным вырождением.

На защиту выносятся:

1. Результаты анализа кристаллической структуры орторомбической ($Pnma$) фазы квазикубических перовскитов с $3d$ -ионами и модели этой фазы.
2. Описание орбитального состояния кристаллов RMO_3 ($R = La, Y$; $M = Ti, V, Mn$) с помощью вибронного гамильтониана (H_{vib}) и анализ влияния первых и вторых соседей на электронное состояние M -ионов.
3. Результаты микроскопического расчёта изотропных и анизотропных спин-спиновых взаимодействий и g -факторов для разных орбитальных состояний.
4. Теоретическое описание магнитных структур и спектров магнитных возбуждений (спиновых волн и магнитного резонанса) для различных орбитальных состояний магнитных ионов $M = Mn^{3+}, Ti^{3+}$ и V^{3+} в соединениях RMO_3 .

Апробация работы. Результаты работы докладывались на следующих конференциях, симпозиумах и семинарах:

- XII Российская студенческая научная конференция «Проблемы теоретической и экспериментальной химии» (Екатеринбург, 2002 г.),
- XVIII международная школа–семинар «Новые магнитные материалы микроэлектроники» (Москва, 2002 г.),
- XXXIII Совещание по физике низких температур (Екатеринбург, 17–20 июня 2003 г.),

- XXX, XXI и XXXII Международные зимние школы физиков-теоретиков «Коуровка» (Екатеринбург – Челябинск, 2004, 2006 гг. и Новоуральск, 2008 г.),
- V, VI VII и VIII Молодежные семинары по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, 2004, 2005, 2006 и 2007 гг.),
- XII и XIII Международные феофиловские симпозиумы по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов (Екатеринбург, 2004 г.; Иркутск, 2007 г.),
- XVI Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников (Екатеринбург – Кыштым, 2006 г.),
- 5th Asia-Pacific EPR/ESR Symposium (Новосибирск, 2006 г.),
- Euro–Asian Symposium «Magnetism on a Nanoscale» (Казань, 2007 г.),
- Международная конференция «Modern development of magnetic resonance» (Казань, 2007 г.),
- 11 Международная научная школа «Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложения» (Казань, 2007 г.),
- Семинары кафедры компьютерной физики Уральского государственного университета.

Публикации и личный вклад автора. По материалам диссертации опубликовано 9 статей и 17 тезисов докладов, список которых приведён в конце автореферата.

Все основные результаты работы были получены лично автором или при его активном участии. Выбор направления исследований, формулировка задач и обсуждение результатов проводились совместно с научным руководителем профессором А.Е. Никифоровым и с Л.Э. Гончарь. Определение каналов структурного фазового перехода было выполнено автором совместно с научным руководителем профессором А.Е. Никифоровым. Расчёт постоянных вибронной связи в титанатах и ванадатах был проделан Лариным А.В. при активном участии автора. Расчёт низкоэнергетического спектра ионов Ti^{3+} и V^{3+} в кристаллическом поле, определение параметров сверхобменных взаимодействий, равновесной магнитной структуры и спектров магнитных возбуждений были проделаны автором лично.

Работа выполнена на кафедре компьютерной физики Уральского государственного университета им. А.М. Горького и в отделе оптоэлектроники и полупроводниковой техники НИИ ФПМ УрГУ при частичной поддержке

российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ, гранты № 04-02-96078 и № 04-02-16204) и фонда «Династия».

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка цитируемой литературы. Общий объем работы составляет 172 страницы, включая 22 рисунка, 17 таблиц и список литературы из 204 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дано обоснование актуальности выбранной темы диссертации, сформулирована цель работы и задачи исследования, обозначены основные положения, выносимые на защиту и приведено краткое содержание работы по главам.

Первая глава посвящена анализу кристаллической структуры орторомбических перовскитных оксидов с $3d$ -ионами и рассмотрению формирования этой структурной фазы из высокосимметричной – кубической.

Для описания характерных особенностей пространственной структуры кристалла используется симметричный анализ, основанный на концепции фазового перехода по одному неприводимому представлению. Такой метод был использован для построения моделей структур фаз манганитов,⁴ но для систем, содержащих $3d$ -ионы с трехкратно вырожденным орбитальным состоянием, он ранее не применялся. Ионы Ti^{3+} и V^{3+} в кубическом кристаллическом поле обладают термами 2T_2 и 3T_1 соответственно, то есть находятся как раз в состояниях с триплетным орбитальным вырождением. Эти ионы, следовательно, могут проявить активность в смысле эффекта Яна–Теллера (ЯТ). Такая активность означает сильную взаимосвязь решётки с орбитальными степенями свободы, а сам эффект Яна–Теллера заключается в снятии орбитального вырождения иона за счёт искажений высокосимметричной структуры его окружения. ЯТ–активными в линейном приближении могут быть локальные искажения решётки следующих типов:

$$\begin{aligned} \{e_g \otimes e_g\}^{sym} &= A_{1g} + E_g \text{ — для орбитальных дублетов,} \\ \{t_{2g} \otimes t_{2g}\}^{sym} &= \{t_{1g} \otimes t_{1g}\}^{sym} = A_{1g} + E_g + T_{2g} \text{ — для орбитальных триплетов} \end{aligned} \quad (1)$$

(*sym* означает «симметричная часть»).

⁴ Найш В.Е. // ФММ, т. 85, вып. 6, стр. 5–11 (1998); Найш В.Е. // ФММ, т. 92, вып. 4, стр. 3–21 (2001).

Такие искажения, с одной стороны, сильно связаны с орбитальными степенями свободы кристалла системы, с другой стороны, они могут играть важную роль в формировании его пространственной структуры.

В соединениях $RM\text{O}_3$ (R – редкоземельный ион или Y ; M – $3d$ -ион) при низких температурах наблюдается орторомбическая фаза ($Pnma$, D_{2h}^{16} – см. рис. 1). Экспериментально измеряемые координаты ионов в кристаллической ячейке не могут ни указать, каким образом сформировалась низкосимметричная фаза конкретного соединения, ни подчеркнуть её особенности. Анализ кристаллической структуры становится удобным, простым и наглядным при использовании симметризованных искажений Q_α .

Ближайшее окружение $3d$ -ионов в соединениях $RM\text{O}_3$ – кислородные октаэдры, а наибольшие по величине искажения этих октаэдров в $Pnma$ -фазе – это Q_x , Q_y и Q_z – искажения T_{1g} -типа. Сами они не являются ЯТ-активными, но из их квадратов можно составить инварианты E_g - и T_{2g} -типов, которые взаимодействуют с орбитальным состоянием ионов Mn^{3+} , Ti^{3+} или V^{3+} .

При построении моделей структур фаз соединений с целью дальнейшего определения взаимосвязи решёточных и орбитальных степеней свободы в них, необходимо рассматривать искажения решётки, которые: а) не противоречат симметрии фазы (D_{2h}^{16}); б) могут участвовать в линейном ЯТ-взаимодействии; наконец, в) являются наибольшими. Таким образом, в кристаллах LaMnO_3 , LaTiO_3 , YTiO_3 , LaVO_3 и YVO_3 необходимо рассматривать искажения Q_ϵ , Q_θ – E_g -типа, Q_ξ , Q_η , Q_ζ – T_{2g} -типа, а также линейные комбинации квадратов T_{1g} -искажений: Q_x , Q_y и Q_z .

Поскольку в соединениях $RM\text{O}_3$ ионы кислорода находятся между двумя соседними ионами M^{3+} , то искажения кислородных октаэдров в реальном ве-

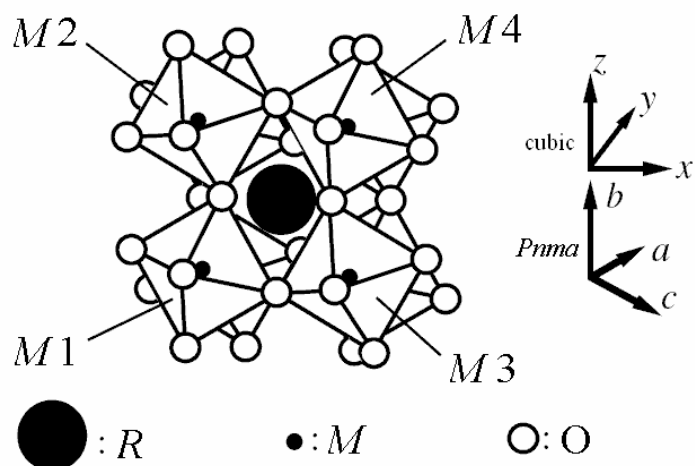


Рис. 1. Орторомбическая ($Pnma$) ячейка кристаллов $RM\text{O}_3$, сформированная искажениями кислородных октаэдров из кубической ячейки.

естве не могут быть независимыми – они образуют искажённую структуру кристалла. Поэтому *локальное искажение* Q_α «размноженное» по кристаллу в соответствии с некоторым волновым вектором \mathbf{k} , индуцирует *моду искажений* $q_\alpha^{\mathbf{k}}$.

Анализ трансформационных свойств Q_α выделяет те из них, которые, преобразуясь под действием операций пространственной группы (D_{2h}^{16}), нарушают симметрии кристалла. Они сопоставляются сохраняющимся компонентам того или иного параметра порядка, то есть тем модам $q_\alpha^{\mathbf{k}}$, которые отвечают за формирование низкосимметричной фазы. Значимые искажения для конкретного соединения, определяются сравнением относительных величин различных Q_α в данном веществе.

Результаты симметричного анализа – совокупность мод искажений, определяющих низкосимметричную фазу кристалла, своего рода «шифр» структуры. Для рассматриваемых в диссертации соединений эти «шифры» оказались следующими:

$[(\varphi_x, \varphi_y, \psi_z) + q_\varepsilon^{xy}]$ – для LaMnO_3 (O' -фаза), совпадает с результатом [4];

$[(\varphi_x, \varphi_y, \psi_z)]$ – для LaTiO_3 ;

$[(\varphi_x, \varphi_y, \psi_z) + (q_\xi - q_\eta)]$ – для YTiO_3 ;

$[(\varphi_x, \varphi_y, \psi_z)]$ – для LaVO_3 ;

$[(\varphi_x, \varphi_y, \psi_z) + (q_\xi - q_\eta)]$ – для YVO_3 .

Здесь φ и ψ – устоявшиеся в литературе обозначения мод, которые соответствуют искажениям T_{1g} -типа – т.н. «антитилтинг» (в R-точке зоны Бриллюэна) и «тилтинг» (в M-точке); q_ε^{xy} – одна из мод, соответствующих искажению Q_ε (в M-точке зоны Бриллюэна), а $(q_\xi - q_\eta)$ – линейная комбинация мод, соответствующих локальным искажениям Q_ξ и Q_η (в R-точке).

Вторая глава диссертации посвящена описанию орбитального состояния ионов M^{3+} в соединениях RMO_3 в условиях сильной взаимосвязи этого состояния с решёткой кристалла.

Бесспорного экспериментального способа наблюдения орбитальной структуры в настоящий момент не существует,⁵ а её наличие можно надёжно утверждать лишь для соединений с сильным эффектом Яна–Телера. Поэтому общепризнанным является наличие орбитальной структуры в подрешётке ио-

⁵ Subías G. et al. // Phys. Rev. B, v. 75, no. 23, p. 235101 (1–8) (2007).

нов Mn^{3+} редкоземельных манганитов,⁶ в то время как проблема орбитального состояния ионов Ti^{3+} и V^{3+} в соединениях $RTiO_3$ и RVO_3 до сих пор не решена.

Для определения орбитального состояния ионов M^{3+} в сильно коррелированных соединениях RMO_3 можно воспользоваться таким вариантом теории кристаллического поля, который в явном виде учитывает связь решётки с орбитальным движением электронов. Это подход на основе вибронного гамильтониана. Для ионов с трёхкратным орбитальным вырождением (триплетных ионов) такой гамильтониан можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 H_{vib} = H_l + H_{QQ} + H_R = \\
 = V_e \cdot (Q_\theta X_\theta + Q_\varepsilon X_\varepsilon) + V_t \cdot (Q_\xi X_\xi + Q_\eta X_\eta + Q_\zeta X_\zeta) + \\
 + V_a \cdot (Q_x^2 + Q_y^2 + Q_z^2) X_{A1} + \\
 + V_b \cdot \left[(2Q_z^2 - Q_x^2 - Q_y^2) X_\theta + \sqrt{3}(Q_x^2 - Q_y^2) X_\varepsilon \right] + \\
 + V_c \cdot (Q_y Q_z X_\xi + Q_x Q_z X_\eta + Q_x Q_y X_\zeta) + \\
 + V_e^R \cdot (Q_\theta^R X_\theta + Q_\varepsilon^R X_\varepsilon) + \\
 + V_t^R \cdot \left[(Q_{\xi,1}^R + Q_{\xi,2}^R) X_\xi + (Q_{\eta,1}^R + Q_{\eta,2}^R) X_\eta + (Q_{\zeta,1}^R + Q_{\zeta,2}^R) X_\zeta \right]
 \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь V_e , V_t , V_a , V_b , V_c , V_e^R и V_t^R – постоянные вибронной связи; X_θ , X_ε , X_ξ , X_η , X_ζ – симметризованные орбитальные операторы, записанные на базисе триплета вещественных $3d-t_{2g}$ -функций (ξ , η , ζ); Q_α , Q_α^R – различные симметризованные смещения. Слагаемые с V_e и V_t описывают линейное взаимодействие триплетного электронного состояния с искажениями решётки согласно (1) (H_{lin}), слагаемые, содержащие V_a , V_b и V_c «отвечают» за взаимодействие того же состояния с инвариантами, построенными из квадратов искажений T_{1g} -типа (H_{QQ}), и, наконец, последние два слагаемых с V_e^R и V_t^R учитывают влияние вторых соседей на орбитальное состояние иона M^{3+} (H_R).

В выражении (2) орбитальные операторы X_α известны, симметризованные смещения октаэдра первых соседей и куба вторых соседей (Q_α и Q_α^R) определяются исходя из экспериментальных данных по кристаллической структуре, а постоянные вибронной связи V_α и V_α^R необходимо рассчиты-

⁶ См. обзоры: Локтев В.М., Погорелов Ю.Г. // ФНТ, т. 26, № 3, стр. 231–261 (2000); Изюмов Ю.А., Скрыбин Ю.Н. // УФН, т. 171, № 2, стр. 121–148 (2001); Salamon M.B. // Rev. Mod. Phys., v. 73, no. 3, pp. 583–628 (2001).

вать. Эти постоянные должны по возможности учитывать все факторы формирования орбитальной структуры, явно не вошедшие в (2), такие как: конечные размеры ионов, ковалентность и взаимодействие с далёкими соседями. Влияние этих факторов на величины постоянных связи V_α и V_α^R позволяет учесть неэмпирический кластерный расчёт. При этом рассматривается кластер, состоящий из ионов M^{3+} и O^{2-} , который окружён несколькими сотнями точечных зарядов, моделирующих остаток кристалла.

Расчёт постоянных вибронной связи проводился с помощью пакета GAMESS⁷ в рамках метода МО ЛКАО⁸ с многоконфигурационным самосогласованием. Учёт электронных корреляций проводился двумя путями: по теории возмущений Моллера–Плессета (в титанатах) и с помощью включения конфигурационного взаимодействия внутри $3d$ -оболочки (в ванадатах). Подобные расчёты оказалось возможно провести только численно с использованием мощных вычислительных кластеров.

Используя H_{vib} , можно указать причину возникновения E_g - и T_{2g} -типов искажений в $RTiO_3$, RVO_3 – это относительно большие T_{1g} -искажения (~ 0.5 Å). Эти искажения приводят к расщеплению t_{2g} -состояния в результате «прямого» вибронного эффекта – взаимодействия линейных комбинаций квадратов искажений Q_x , Q_y и Q_z с t_{2g} -электронами (H_{QQ}). Снятие вырождения t_{2g} -уровня таким образом приводит к появлению индуцированных искажений Q_ϵ , Q_θ , Q_ξ , Q_η и Q_ζ за счёт «обратного» вибронного взаимодействия (H_{lin}). То есть, установившаяся за счёт наличия T_{1g} -искажений орбитальная структура индуцирует искажения E_g - и T_{2g} -типов. Величины Q_ϵ , Q_θ , Q_ξ , Q_η и Q_ζ тогда должны быть меньше Q_x , Q_y и Q_z , что и наблюдается в титанатах и ванадатах ($Q_{\epsilon,\theta,\xi,\eta,\zeta} \sim 0.1 \cdot Q_{x,y,z}$).

Такой механизм не может реализовываться в манганитах. Ион Mn^{3+} в $LaMnO_3$ обладает термом 5E , поэтому в вибронном эффекте, связанном с H_{QQ} могут участвовать только линейные комбинации из Q_x , Q_y и Q_z A_{1g} - и E_g -типов (см. (1)). Но взаимодействие электронной подсистемы с линейной комбинацией A_{1g} -типа не приводит к расщеплению e_g -уровня, а величины квадратичных по $Q_{x,y,z}$ линейных комбинаций типа E_g близки к нулю, так как $Q_x \approx Q_y \approx$

⁷ Schmidt M.W. et al. // J. Comput. Chem., v. 14, p. 1347–1363 (1993);

Schmidt M.W., Gordon M.S. // Annu. Rev. Phys. Chem., v. 49, p. 233–266 (1998).

Версия для PC: Грановский А.А. – <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>.

⁸ МО ЛКАО – молекулярные орбитали как линейные комбинации атомных орбиталей.

Q_z и, значит, тоже не взаимодействуют с электронным состоянием. Причина возникновения большого искажения Q_e (~ 0.25 Å) в манганите – «обычный» эффект Яна–Теллера⁹. Эффект Яна–Теллера в LaMnO_3 настолько силён, что $Q_e \gg Q_\zeta, Q_\eta, Q_\zeta$, тогда как в остальных соединениях, рассмотренных в данной работе, выполняется другое соотношение: $Q_e \approx Q_\zeta, Q_\eta, Q_\zeta$.

Пример манганита лантана показывает, что T_{1g} -искажения играют основную роль в формировании кристаллической структуры орторомбических перовскитов (см. шифры структур), но при этом не всегда определяют орбитальное состояние $3d$ -ионов в этих соединениях.

Расчёт орбитального спектра Ti^{3+} и V^{3+} в соединениях RTiO_3 и RVO_3 (с $R = \text{La}, \text{Y}$) при помощи H_{vib} показал, что в этих соединениях основным состоянием $3d$ -ионов является орбитальный синглет (см. Табл. 1). Таким образом, был подтверждён результат исследований LaTiO_3 и YTiO_3 в рамках других модификаций теории кристаллического поля,¹⁰ а также результаты исследований электронной структуры титанатов и ванадатов в рамках теории функционала плотности (density functional theory, DFT).¹¹ Однако вывод о синглетном орбитальном состоянии в некоторых из рассматриваемых соединений ставится под сомнение моделированием этих систем в рамках предположения о сильном сверхобменном взаимодействии. Такой подход развит для титанатов и ванадатов в работах Халиуллина, Олеша и др.¹²

Тем не менее, воспроизведение результатов других исследований орбитального состояния RTiO_3 и RVO_3 с помощью H_{vib} является аргументом в пользу применения вибронной модели. Но в отличие от результатов предыдущих работ, которые только констатируют наличие синглетного основного состояния в этих соединениях, с помощью вибронного гамильтониана (2) можно анализировать влияние различных вкладов в H_{vib} на электронное состояние ионов M^{3+} . Такой анализ показал важную роль вторых соседей в

⁹ Nikiforov A.E., Popov S.E., Shashkin S.Yu. // Phys. Met. Metall., v. 87, no. 2, p. 97–102 (1999).

¹⁰ Mochizuki M., Imada M. // New J. of Physics, v. 6, no. 1, p. 154 (1–42) (2004);

Shmitz R. et al. // Phys. Rev. B, v. 71, no. 14, p. 144412 (1–12) (2005).

Schmitz R. et al. // cond-mat/0506328 (1–13) (2005).

Игламов В.В., Еремин М.В. // ФТТ, т. 49, вып. 2, стр. 221–226 (2007).

¹¹ Streltsov S.V. et al. // Phys. Rev. B, v. 71, no. 24, p. 245114 (1–10) (2005);

Solov'yev I. V. // Phys. Rev. B, v. 74, № 5, p. 054412 (1–26) (2006);

Pavarini E. et al. // Phys. Rev. Lett., v. 92, no. 17, p. 176403 (1–4) (2004);

Raychaudhury M.D. et al. // Phys. Rev. Lett., v. 99, no. 12, p. 126402 (1–4) (2007).

¹² Khaliullin G. // Progr. Theor. Phys. Suppl., v. 160, p. 155–202 (2005);

Oleś A.M. et al. // Phys. Rev. B, v. 72, no. 21, p. 214431 (1–32) (2005).

Таблица 1. Спектры ионов Ti^{3+} и V^{3+} с координатами (0,0,0) в ячейке $Pnma$ -фазы соединений $LaTiO_3$, $YTiO_3$, $LaVO_3$ и YVO_3 . Энергии уровней спектра упорядочены по возрастанию и отсчитываются от основного состояния.

| | $LaTiO_3$ | $YTiO_3$ | $LaVO_3$ | YVO_3 |
|------------------|----------------------|---------------------|------------------------------------|----------------------|
| Базис | (ξ, η, ζ) | | $(\eta\zeta, \zeta\zeta, \xi\eta)$ | |
| Волновые функции | (-0.61, -0.45, 0.65) | (-0.58, 0.28, 0.76) | (0.20, -0.85, -0.49) | (0.89, 0.45, 0.09) |
| | (0.79, -0.26, 0.56) | (0.70, -0.30, 0.64) | (0.71, -0.22, 0.67) | (0.40, -0.65, -0.65) |
| | (0.08, -0.86, -0.51) | (0.42, 0.91, -0.02) | (-0.67, -0.48, 0.56) | (0.24, -0.62, 0.75) |
| Энергии (Эв) | 0 | 0 | 0 | 0 |
| | 0.181 | 0.172 | 0.041 | 0.104 |
| | 0.213 | 0.292 | 0.089 | 0.201 |

формировании низкоэнергетического спектра иона Ti^{3+} в $RTiO_3$: половина величины расщепления между основным и первым возбуждённым состоянием в этой системе определяется кристаллическим полем ионов La или Y. В то же время, вторые соседи иона V^{3+} в RVO_3 мало влияют на его орбитальное состояние.

В третьей главе диссертации рассматривается взаимосвязь орбитальных и спиновых степеней свободы в титанатах и ванадатах и в микроскопической модели определяются параметры изотропных и анизотропных сверхобменных взаимодействий в этих соединениях. Полученные параметры используются для построения эффективного спин-гамильтониана (ЭСГ) исследуемых систем.

В первую очередь, определяется изотропный сверхобмен (J), для чего применяется теория сверхобменного взаимодействия, изначально предложенная Андерсоном¹³ и развитая для ионов с трёхкратным орбитальным вырождением Кугелем и Хомским.¹⁴

Изотропный сверхобмен между спинами пары $3d$ -ионов S_i и S_j , разделённых немагнитным катионом, можно записать в обычном виде:

$$H_{ex} = \sum_{\langle i, j \rangle} f_{ij} \left(\frac{1}{2} + 2\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \right), \quad (3)$$

где f_{ij} – орбитальный оператор. Соединения $RTiO_3$ и RVO_3 являются мотт-хаббардовскими диэлектриками, то есть затраты энергии Δ на перенос заряда

¹³ Anderson P.W. // Phys. Rev., v. 155, no. 1, p. 2–13 (1959).

¹⁴ Кугель К.И., Хомский Д.И. // ФТТ, т. 17, вып. 2, стр. 454–461 (1975);

Кугель К.И., Хомский Д.И. // УФН, т. 136, вып. 4, стр. 621–664 (1982).

с $3d$ -иона на ближайший кислород больше затрат U на перенос электрона на соседний $3d$ -ион.¹⁵ Тогда f_{ij} для пары вдоль оси z можно записать так:

$$f_{ij}^z = \frac{2t_{ij}^2}{9U} (X_{A1}^i X_{A1}^j + X_{\theta}^i X_{\theta}^j + 3X_{\varepsilon}^i X_{\varepsilon}^j - X_{A1}^i X_{\theta}^j - X_{\theta}^i X_{A1}^j) + \frac{t_{ij}^2}{2U} (X_{\gamma}^i X_{\gamma}^j + X_{\zeta}^i X_{\zeta}^j). \quad (4)$$

Здесь t_{ij} и U – параметры модели Хаббарда: кинетическая энергия переноса электрона между i -ым и j -ым ионами и энергия кулоновского взаимодействия двух электронов на одном узле. Суммирование в (3) идёт по всем эквивалентным парам в ячейке кристалла. Выражение (4) для простоты записано без учёта внутриаомного обмена (J_H).

При фиксированном орбитальном порядке (orbital order, ОО), установившемся, например, за счёт кристаллического поля (H_{cf}), усреднение оператора (4) даёт постоянную изотропного спин–спинового взаимодействия:

$J_{ij}^{OO} = \langle \psi_i^0 \psi_j^0 | f_{ij} | \psi_i^0 \psi_j^0 \rangle$, где ψ_i^0 и ψ_j^0 – орбитальные функции основных состояний ионов i и j . С другой стороны, оператор сверхобмена H_{ex} при фиксированной магнитной структуре можно считать чисто орбитальным оператором, определяющим электронный спектр магнитных ионов системы. Возможен и ещё один случай, когда в системе нет никаких взаимодействий, кроме H_{ex} и орбитально–спиновое состояние кристалла определяется исключительно спектром сверхобменного гамильтониана.

Первый подход предполагает, что кристаллическое поле гораздо сильнее сверхобмена ($H_{cf} \gg H_{ex}$), в двух других случаях имеет место обратное соотношение ($H_{ex} \gg H_{cf}$).

При определённом типе магнитного упорядочения, может оказаться, что энергетически выгодным является такое состояние, в котором отсутствует орбитальный порядок в кристалле, то есть, нет фиксированного относительного распределения электронных плотностей соседних $3d$ -ионов. Согласно расчётам [12], такое состояние, получившее название «орбитальной жидкости», должно реализовываться в LaTiO_3 .

Результат использования модели кристаллического поля для соединений RTiO_3 и RVO_3 – статическая орбитальная структура этих кристаллов. При этом выполняется соотношение ($H_{cf} \gg H_{ex}$). Тем не менее, низкоэнергетические спектры ионов Ti^{3+} и V^{3+} , полученные в таком приближении, могут быть

¹⁵ Соотношения Δ и U для большинства соединений типа RMO_3 определены в работе Mizokawa Т., Fujimori А. // Phys. Rev. B, v. 54, no. 8, p. 5368–5380 (1996). Для $M = \text{Ti}^{3+}, \text{V}^{3+}$ $\Delta > U$, а для Mn^{3+} , например, $\Delta < U$.

использованы для исследования вопроса о влиянии различных орбитальных состояний на магнитный порядок в рассматриваемых соединениях.

Если предположить наличие в соединении сильных орбитальных флуктуаций (orbital fluctuations, OF), то можно вычислить в таком гипотетическом состоянии сверхобменные параметры, усредняя их по всем возможным комбинациям орбитальных состояний ионов в паре:

$$J_{ij}^{OF} = \frac{\sum_{k=1}^n \sum_{p=1}^n \langle f_{ij}(\psi_i^k, \psi_j^l) \rangle}{n^2}, \quad (5)$$

где k и l нумеруют орбитальные состояния i -го и j -го ионов, число которых на каждом ионе равно n .

Моделирование показало, что для рассматриваемых соединений титана и ванадия, величины J_{ij}^{OO} и J_{ij}^{OF} имеют одинаковый знак и отличаются лишь по величине. Например, в YVO_3 величины изотропного сверхобмена для ионов в плоскости ac ($Pnma$) составляют 3.76 мЭВ и 5.00 мЭВ для статического (ОО) и «сильно флуктуирующего» (OF) орбитальных состояний соответственно. Но величины J определяются параметрами модели Хаббарда (t , U и J_H), расчёт которых разными авторами даёт сильно отличающиеся результаты,¹⁶ а экспериментальное измерение всей их совокупности затруднено. Таким образом, важны не абсолютные величины этих параметров, а их знаки, вид и соотношения между ними.

Удивительное различие знаков изотропного сверхобменного взаимодействия между ионами Ti^{3+} в кристаллах $LaTiO_3$ и $YTiO_3$ можно объяснить качественно, если учесть в (4) внутриатомный обмен J_H . Расчёт, результаты которого хорошо описывают экспериментальные данные,¹⁷ в этом случае показывает: $J_{ac}(La) \approx J_b(La) = J_{La} > 0$, а $J_{ac}(Y) \approx J_b(Y) = J_Y < 0$, причём $J_{La}/J_Y \approx 5$. Это различие есть следствие двух причин: во-первых, разных орбитальных состояний ионов Ti^{3+} в $LaTiO_3$ и $YTiO_3$ (см. Табл. 1), а во-вторых, различия кристаллической структуры этих соединений (тилтинговые искажения в $LaTiO_3$ составляют ~ 0.6 Å, а в $YTiO_3$ ~ 1 Å).

¹⁶ Например, U составляет 4.0 или 3.45 эВ по данным работ Соловьёва (см. ссылку [11]) и Мизокавы с Фуджимори (Mizokawa T., Fujimori A. // Phys. Rev. B, v. 54, no. 8, p. 5368–5380 (1996)) соответственно.

¹⁷ Измерение J в $LaTiO_3$: Keimer B. et al. // Phys. Rev. Lett., v. 85, no. 18, pp. 3946–3949 (2000).

В $YTiO_3$: Ulrich C. Et al. // Phys. Rev. Lett., v. 89, no. 16, pp. 167202 (1–4) (2002).

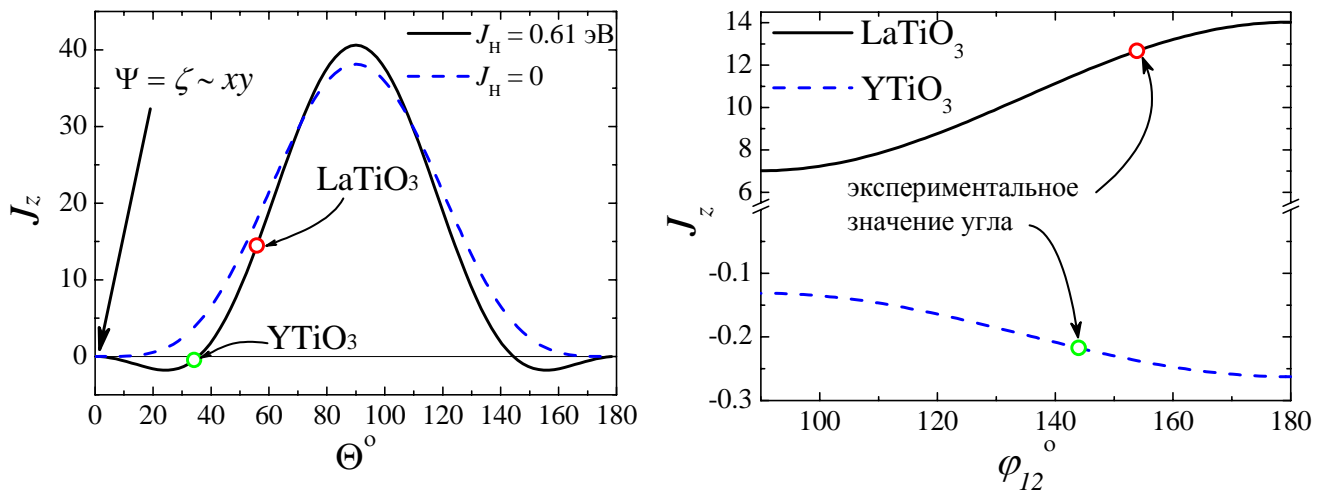


Рис. 2. Зависимость оператора изотропного сверхобмена $f_{ij}(Oz)$ от орбитального угла (слева) и от угла сверхобменной связи (справа).

На рисунке 2 изображена зависимость оператора $f_{12} = f_z$ от орбитального состояния ионов Ti^{3+} , выраженного через т.н. орбитальные углы Θ и Φ : $(C_\xi, C_\eta, C_\zeta) = (\sin\Theta\cos\Phi, \sin\Theta\sin\Phi, \cos\Theta)$, а также зависимость этого оператора от угла сверхобменной связи¹⁸ – угла $Ti-O-Ti$. Видно, что f_z в обоих случаях сильно модулируется, а в зависимости от угла Θ может даже изменить знак. Таким образом, различные знаки изотропного сверхобменного взаимодействия реализуются в титанатах La и Y из-за сильного различия орбитальных и кристаллических структур этих кристаллов.

Пользуясь известными методами теории возмущений¹⁹ и оператором (3), можно рассчитать величины g-факторов ($g_{a,b}$) и параметров парных анизотропных сверхобменных взаимодействий для ионов a и b : одноионной анизотропии (в ванадатах) – $A_{a,b}^{si}$, антисимметричного анизотропного обмена (взаимодействия Дзялошинского–Мория) – D_{ab} , и симметричного анизотропного обмена (двухионной анизотропии) – A_{ab} . Все эти величины вместе с J_{ab} входят в эффективный спин–гамильтониан (ЭСГ) и таким образом определяют магнитные свойства соединения. Сам ЭФГ в случае учёта только парных взаимодействий между спинами S_a и S_b можно записать так:

¹⁸ См., например, Москвин А.С., Бострем И.Г. // ФТТ, т. 19, № 9, стр. 1616–1626 (1977).

¹⁹ Moriya T. // Phys. Rev., v. 120, no. 1, p. 91–98 (1960);

Абрагам А., Блيني Б. «Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов», Т.1. М.: «Мир», 1972 г. 652 с.

Митрофанов В.Я., Никифоров А.Е., Черепанов В.И., «Спектроскопия обменно-связанных комплексов в ионных кристаллах». М.: «Наука», 1985 г. 144 с.

См. также [18].

$$H_{ESH} = J_{ab}(\mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_b) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} A_{ab}^{\alpha\beta} \cdot (S_a^\alpha S_b^\beta + S_a^\beta S_b^\alpha) + \mathbf{D}_{ab}(\mathbf{S}_a \times \mathbf{S}_b) + \\ + \sum_{\alpha, \beta} (A_{a, \alpha\beta}^{si} \cdot S_a^\alpha S_a^\beta + A_{b, \alpha\beta}^{si} S_b^\alpha S_b^\beta) + \sum_{\alpha, \beta} (g_a^{\alpha\beta} \cdot S_a^\alpha H^\beta + g_b^{\alpha\beta} \cdot S_b^\alpha H^\beta). \quad (6)$$

Здесь α и β – компоненты векторов и тензоров, а \mathbf{H} – напряжённость внешнего магнитного поля.

Исследованию магнитных свойств LaMnO_3 , LaTiO_3 , YTiO_3 , LaVO_3 и YVO_3 на основе ЭФГ (6) посвящена **четвертая глава** диссертации.

На основании ЭФГ, содержащего микроскопически определённые сверхобменные взаимодействия, можно построить термодинамический потенциал Ω магнитной подсистемы соединения. Этот потенциал служит для описания макроскопических свойств рассматриваемых веществ.

С использованием симметричного подхода нетрудно проанализировать, какие возможны магнитные структуры в орторомбических магнетиках с $3d$ -

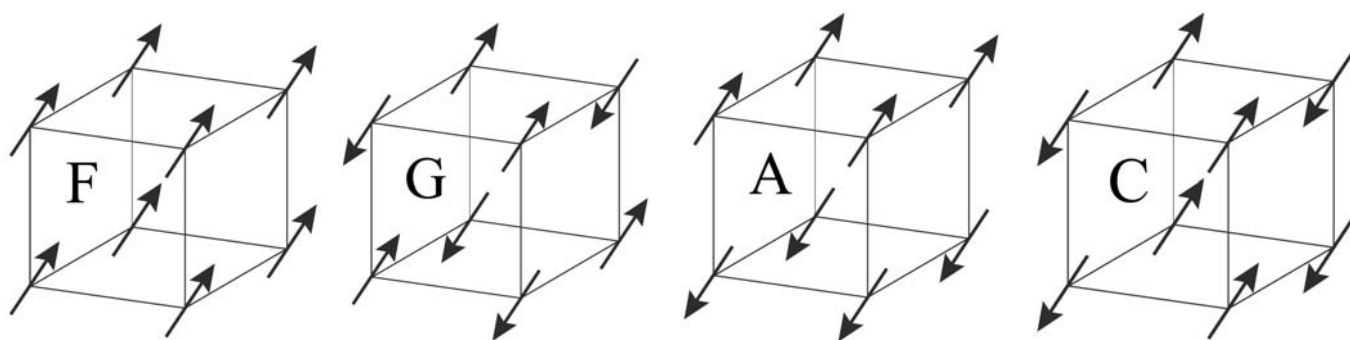


Рис. 3. Типы магнитных структур орторомбических магнетиков.

ионами.²⁰ Эти структуры такие: (A_x, F_y, G_z) , (G_x, C_y, A_z) , (F_x, A_y, C_z) и (C_x, G_y, F_z) . Выбор же единственной магнитной структуры из всех возможных представляет собой задачу, которая для многоподрешёточного магнетика может быть решена только численно – с помощью минимизации Ω . Именно таким способом получены неколлинеарные магнитные структуры в соединениях LaMnO_3 , RTiO_3 , RVO_3 в двух орбитальных состояниях (ОО и OF).

В эксперименте зачастую можно определить только тип магнитной структуры (см. рис. 3). Однако расчёты показали, что тип магнитной структуры не может указать, какое орбитальное состояние реализуется в реальных соединениях, поскольку в двух различных предположениях (ОО и OF) *типы*

²⁰ Симметричное описание магнитных структур можно найти в книгах: 1) Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Озеров Р.П. «Нейтроннография магнетиков» – М.: «Атомиздат», 1981. 311 с. 2) Туров Е.А., Колчанов А.В., Меньшенин В.В., Мирсаев И.Ф., Николаев В.В. «Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков» – М.: «Физматлит», 2000. 560 с. В них, в частности, рассмотрены и орторомбические магнетики RMO_3 .

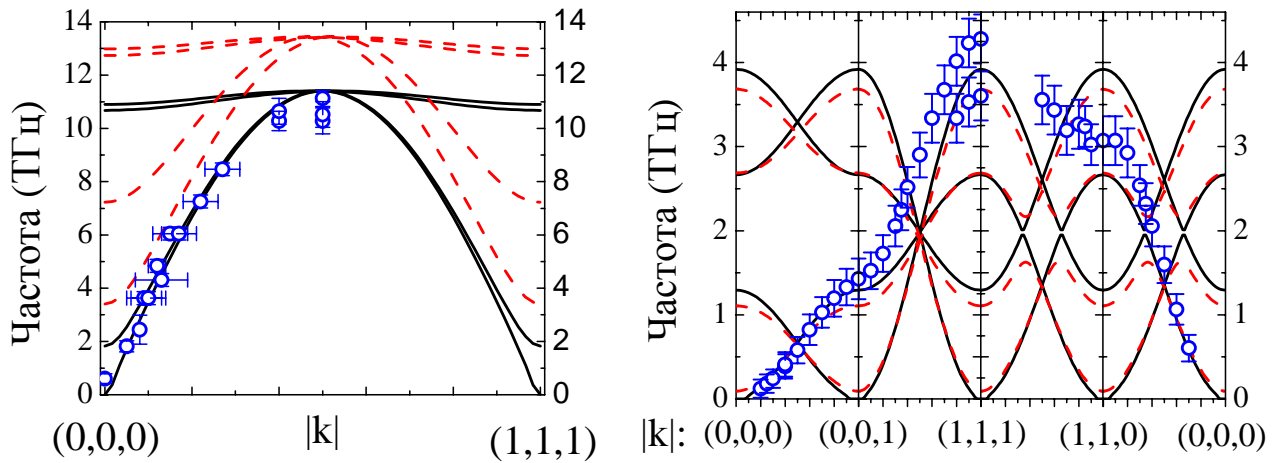


Рис. 4. Спектры спиновых волн в LaTiO_3 (слева) и YTiO_3 (справа). Сплошные и пунктирные линии соответствуют статическому орбитальному порядку без флуктуаций (ОО) и с сильными флуктуациями (ОФ). Точки – эксперимент.

магнитных структур совпадают. Отличаются лишь малые компоненты структур. Например, в YVO_3 орбитальному состоянию «ОО» отвечает магнитная структура (C_x, G_y, F_z) с наибольшей G_y -компонентой. Орбитальному состоянию «ОФ» этого соединения отвечает магнитная структура (G_x, C_y, A_z) с максимальной G_x -компонентой. Экспериментально же установлено только то, что в орторомбическом YVO_3 магнитная структура G-типа.²¹

В рамках линейного приближения можно теоретически определить энергетические спектры спиновых волн (СВ) в соединениях LaTiO_3 , YTiO_3 и YVO_3 для случаев сильного кристаллического поля (что даёт статический орбитальный порядок, ОО) и сильного сверхобменного взаимодействия (случай ОФ). Эти спектры демонстрируют удовлетворительное совпадение с экспериментом, несмотря на то, что построены они в рамках противоположных предположений (см. рис. 4).

В то же время, полевые спектры антиферромагнитного резонанса (АФМР) проявляют качественно различное поведения в разных орбитальных состояниях (см. рис. 5). Это поведение обусловлено тем, что магнитная структура конкретного соединения определяется несколькими компонентами: одной наибольшей и несколькими малыми компонентами. Особенности магнитной структуры, наиболее ярко проявляются в магнитном резонансе. Например, магнитная структура LaTiO_3 в орбитально–упорядоченном состоянии (ОО) (A_x, F_y, G_z) , а в состоянии с сильными орбитальными флуктуациями – (G_x, C_y, A_z) , причём в обоих состояниях наибольшая компонента магнитной структуры

²¹ Ulrich C. et al. // Phys. Rev. Lett., v. 91, no. 25, p. 257202 (2003).

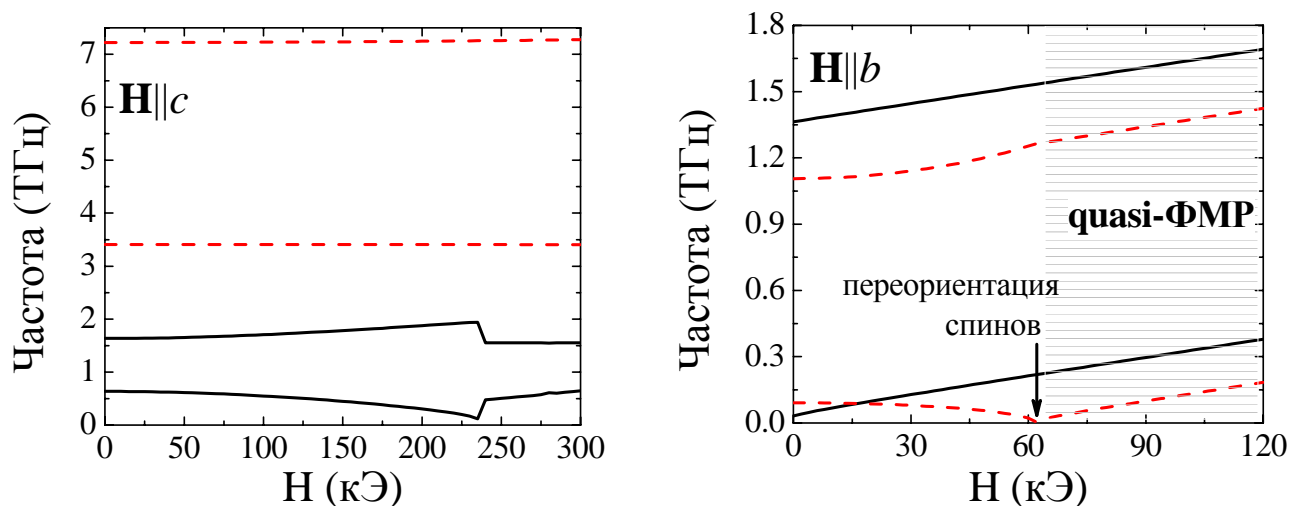


Рис. 5. Полевые спектры антиферромагнитного резонанса в LaTiO_3 (слева) и YTiO_3 (справа). Сплошные и пунктирные линии соответствуют статическому орбитальному порядку без флуктуаций (ОО) и с сильными флуктуациями (ОФ). Показаны только нижние ветви частот (они могут наблюдаться на эксперименте). Магнитное поле направлено вдоль оси преимущественной ориентации магнитных моментов (вдоль лёгкой оси) в состоянии ОО.

(тип магнитной структуры) – G. Так как малые компоненты магнитных структур разные (что трудно определить в экспериментах по нейтронному рассеянию), поведение частот МР в этих орбитальных состояниях LaTiO_3 качественно различны. Для окончательного определения орбитальных состояний ионов Ti^{3+} и V^{3+} в соединениях $R\text{TiO}_3$ и $R\text{VO}_3$ необходимо проведение экспериментов по магнитному резонансу на монокристаллах.

Таким образом, метод магнитного резонанса, является, по-видимому, единственным доступным и надёжным способом различения орбитальных состояний соединений $R\text{MO}_3$.

В заключении подведены итоги работы, приведён перечень основных публикаций по теме диссертации и благодарности автора.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ РАБОТЫ

Проведенная работа по определению влияния решётки на орбитальное состояние, магнитную структуру и спектры спиновых возбуждений орторомбических кристаллов дала следующие результаты.

1. На основе симметричного анализа кристаллической структуры орторомбической фазы квазикубических перовскитов определены возможные механизмы формирования этой фазы в тех соединениях, которые содержат $3d$ -ионы с двукратным или трёхкратным орбитальным вырождением элек-

тронного состояния. Таким образом, предыдущие исследования [4] обобщены на случай триплетных $3d$ -ионов.

2. Впервые с помощью вибронного гамильтониана исследованы соединения LaMnO_3 , LaTiO_3 , YTiO_3 , LaVO_3 и YVO_3 . Установлено, что орбитальные состояния $(\text{La}, \text{Y})\text{TiO}_3$, $(\text{La}, \text{Y})\text{VO}_3$ соответствуют статической орбитальной структуре. Разницы в энергиях основных и возбуждённых состояний составляют: ~ 200 мэВ в $(\text{La}, \text{Y})\text{TiO}_3$, ~ 40 мэВ в LaVO_3 и ~ 100 мэВ в YVO_3 .
3. Рассчитаны изотропные и анизотропные спин-спиновые взаимодействия и g -факторы ионов Ti^{3+} и V^{3+} в различных орбитальных состояниях соединений $R\text{TiO}_3$ и $R\text{VO}_3$. Определены равновесные магнитные структуры кристаллов LaMnO_3 , $R\text{TiO}_3$ и $R\text{VO}_3$.
4. В рамках линейного приближения рассчитаны спектры спиновых волн (СВ) в титанатах и ванадатах. Показано, что экспериментальные спектры $R\text{TiO}_3$ и $R\text{VO}_3$ могут быть интерпретированы в рамках противоположных предположений: статической орбитальной структуры и орбитальной структуры при наличии сильных орбитальных флуктуаций.
5. Предсказаны полевые спектры антиферромагнитного резонанса (АФМР) в соединениях LaTiO_3 , YTiO_3 , LaVO_3 и YVO_3 . Показано, что, в отличие от спектров СВ, полевые спектры АФМР могут служить эффективным индикатором орбитального состояния $3d$ -ионов в указанных кристаллах.

Основные результаты диссертации отражены в следующих публикациях.

Статьи в ведущих рецензируемых научных журналах, определенных ВАК:

1. Gontchar L.E., Mozhegorov A.A. «Magnetic structure and antiferromagnetic resonance spectrum in manganites: the effect of orbital structure» – Физика Твёрдого Тела, т. 47, вып. 8, стр. 1455–1458 (2005).
2. Можегоров А.А., Ларин А.В., Никифоров А.Е. «Структура и решёточные искажения орторомбических кристаллов с $3d$ -ионами» – Физика Металлов и Металловедение, т. 105, № 3, стр. 235–244 (2008).
3. Можегоров А.А., Никифоров А.Е., Ларин А.В., Ефремов А.В., Гончарь Л.Э., Агзамова П.А. «Структура, электронные и магнитные свойства LaTiO_3 » – Физика Твёрдого Тела, т. 50, № 9, стр. 1724–1727 (2008).

Статьи в других изданиях:

4. Гончарь Л.Э., Можегоров А.А., Никифоров А.Е. «Исследование зависимости частот магнитного резонанса в LaMnO_3 от направления внешнего магнитного поля» – «Проблемы спектроскопии и спектрометрии» – Меж-

вузовский сборник научных трудов (Екатеринбург, ГОУ УГТУ-УПИ), вып. 12, стр. 3–13 (2003).

5. Гончарь Л.Э., Можегоров А.А., Никифоров А.Е. «Температурная зависимость спектра АФМР в чистом манганите» – «Проблемы спектроскопии и спектрометрии» – Межвузовский сборник научных трудов (Екатеринбург, ГОУ УГТУ-УПИ), вып. 15, стр. 3–10 (2003).
6. Leskova J.V., Gontchar L.E., Nikiforov A.E., Mozhegorov A.A., Agzamova P.A. «The temperature dependence of AFMR and NMR frequencies in manganite» – Proceedings of the Third Moscow International Symposium on Magnetism, pp. 59–62 (2005).
7. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е. «Антиферромагнитный резонанс в LaMnO_3 » – Физика Низких Температур, т. 33, № 2-3, стр. 308–313 (2007).
8. Mozhegorov A.A., Nikiforov A.E., Gontchar L.E. «Antiferromagnetic resonance in LaTiO_3 and YTiO_3 » – Proceedings of the XI International Youth Scientific School «Actual problems of magnetic resonance and its application», 23–28 September 2007, Kazan (edited by prof. M.S. Tagirov and prof. V.A. Zhikharev) – Казань: изд.-во КГУ, стр. 178–182 (2007).
9. Mozhegorov A.A., Gontchar L.E., Nikiforov A.E. «Antiferromagnetic resonance in LaMnO_3 » – Applied Magnetic Resonance, т. 33, № 1-2, стр. 167–176 (2008).

Тезисы докладов в сборниках трудов конференций и симпозиумов:

1. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э. «Спектр антиферромагнитного резонанса в LaMnO_3 », XII Российская студенческая научная конференция «Проблемы теоретической и экспериментальной химии», Екатеринбург, 23–26 апреля 2002 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во Уральского университета, 2002, стр. 286.
2. Гончарь Л.Э., Можегоров А.А., Никифоров А.Е. «Исследование зависимости частот магнитного резонанса в LaMnO_3 от направления внешнего магнитного поля», XXXIII Совещание по физике низких температур, Екатеринбург, 17–20 июня 2003 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2003, стр. 201.
3. Гончарь Л.Э., Можегоров А.А., Никифоров А.Е. «Температурная зависимость спектра АФМР в LaMnO_3 », XXX Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка – 2004», Екатеринбург – Челябинск, 22–28 февраля 2004 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2004, стр. 153.
4. L.E. Gontchar, A.E. Nikiforov, A.A. Mozhegorov «Antiferromagnetic resonance spectrum in manganites: the effect of orbital and charge structures»,

ХII Феофиловский симпозиум по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов, Екатеринбург – Заречный, 22–25 сентября 2004 г. – Екатеринбург: изд.-во ГОУ УГТУ-УПИ, 2004, стр. 31.

5. A.A. Mozhegorov, L.E. Gontchar, A.E. Nikiforov «Temperature dependence of magnetic properties of LaMnO_3 », ХII Феофиловский симпозиум по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов, Екатеринбург – Заречный, 22–25 сентября 2004 г. – Екатеринбург: изд.-во ГОУ УГТУ-УПИ, 2004, стр. 85.
6. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е. «Зависимость магнитных свойств LaMnO_3 от температуры и давления», V Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 29 ноября – 5 декабря 2004 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2004, стр. 34.
7. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е. «Магнитный резонанс в LaMnO_3 », VI Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 28 ноября – 4 декабря 2005 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2005, стр. 43–44.
8. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е. «Антиферромагнитный резонанс в чистом манганите», XXXI Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка – 2006», Екатеринбург, 19–25 февраля, 2006. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2006, стр. 136–137.
9. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е. «Антиферромагнитный резонанс в LaMnO_3 », XVI Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Екатеринбург – Кыштым, 27 февраля – 4 марта 2006 г. Программа и тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2006, стр. 175–176.
10. Mozhegorov A.A., Gontchar L.E., Nikiforov A.E. «Antiferromagnetic resonance in LaMnO_3 », 5th Asia-Pacific EPR/ESR Symposium, Novosibirsk, August 24-27, 2006. Book of Abstracts. – Новосибирск: Новосибирское науч. изд.-во, 2006, стр. 138.
11. Можегоров А.А., Ефремов А.В., Никифоров А.Е. «Обменное взаимодействие в LaTiO_3 », VII Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 27 ноября – 3 декабря 2006 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2006, стр. 47.
12. A.A. Mozhegorov, A.E. Nikiforov, A.V. Larin, A.V. Efremov, L.E. Gontchar, P.A. Agzamova «Structure, electronic and magnetic properties of LaTiO_3 »,

XII Feofilov symposium on spectroscopy of crystals doped by rare earth and transition metal ions, Irkutsk, July 9–13, 2007. Abstracts. – Иркутск: изд.-во Института географии им. В.Б. Сочавы СО РАН, 2007, стр. 80.

13. A.E. Nikiforov, A.A. Mozhegorov, A.V. Larin, L.E. Gontchar «Antiferromagnetic resonance in perovskite titanates», International conference «Modern development of magnetic resonance, Zavoisky 100» September 24–29, 2007. Abstracts. – Казань: изд.-во «ФизтехПресс», КФТИ КазНЦ РАН, 2007, стр. 94.
14. A.A. Mozhegorov, A.V.Larin, A.E. Nikiforov, A.V.Efremov, L.E Gontchar «Interplay of lattice, electronic and magnetic degrees of freedom in orbital-ordered titanates and vanadates», Euro–Asian Symposium «Magnetism on a Nanoscale», Kazan, August 23–26, 2007. Abstract book. – Казань: изд.-во КГУ, 2007, стр. 81.
15. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е. «Магнитный резонанс для крамерсовых ионов: Ti^{3+} в перовските», VIII Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 19–25 ноября 2007 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2007, стр. 56.
16. Гончарь Л.Э., Можегоров А.А., Никифоров А.Е. «Спиновые волны в магнитных диэлектриках», VIII Молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 19–25 ноября 2007 г. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2007, стр. 29.
17. Можегоров А.А., Гончарь Л.Э., Никифоров А.Е. «Магнитные свойства $RTiO_3$ и RVO_3 », XXXII Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка – 2008», Новоуральск, 25 февраля–2 марта, 2008. Тезисы докладов. – Екатеринбург: изд.-во ИФМ УрО РАН, 2008, стр. 147.

Подписано в печать Формат 60×84/16
Печать офсетная. Бумага типографская.
Заказ Усл. печ.л. Тираж
Уральский государственный университет
620000, г. Екатеринбург, К-83, Ленина, 51
Типолаборатория УрГУ